

**Отзыв на автореферат  
диссертации Художиткова Александра Эдуардовича  
«Исследование молекулярной подвижности углеводородов в микропористых металл-  
органических каркасах методом  $^2\text{H}$  ЯМР спектроскопии»,  
представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических  
наук по специальности 01.04.17 - химическая физика, горение и взрыв, физика  
экстремальных состояний вещества**

Гибкие металл-органические каркасы, представляющие собой особый класс пористых координационных полимеров, сегодня являются одними из основных объектов исследования в области физической химии. Структурная реакция данных каркасов на внешние воздействия, такие как сорбция гостевых молекул, температура и давление открывает перспективы создания пористых материалов с управляемыми функциональными свойствами для селективной сорбции, нелинейной механики и оптики. Однако, фундаментальные механизмы, определяющие динамику гибких каркасов при сорбции гостевых молекул, влияние геометрии и химического состава молекул на структурную реакцию каркасов, а также кинетика молекул внутри микропористых каркасов остаются малоизученными. Диссертация А.Э. Художиткова содержит решения целого класса задач в этой области и является, безусловно, актуальной.

Первая глава диссертации носит, главным образом, методологический характер и содержит описание модельных объектов исследования (металл-органические каркасы из серии ZIF-8 и MIL-53 (Al)), подходов к исследованию молекулярной динамики внутри данных каркасов, а также текущее состояние исследований динамики адсорбированных молекул в модельных объектах. Во второй главе теоретически рассматривается модель взаимодействия каркаса с магнитным полем, включающая влияние молекулярного движения на результаты ЯМР через описание Марковского процесса, а также позволяющая качественно оценить скорости молекулярных движений и времен спин-спиновой и спин-решеточной релаксаций. Третья глава посвящена методологическому описанию пробоподготовки и основному в настоящей диссертации методу исследования молекулярной динамики, а именно  $^2\text{H}$  ЯМР.

В завершающей, четвертой, главе представлены основные фундаментальные результаты: Для модельного объекта, ZIF-8, ключевым фактором, определяющим подвижность адсорбированных молекул, является их строение, геометрия, при этом, механизм диффузии представляет собой комбинацию активационного и безбарьерного процессов. Для MIL-53 (Al) установлено, что селективность разделения ксилолов напрямую связана с различной степенью взаимодействия каркаса с пара- и орто-ксилолом. Также разнообразные процессы молекулярной динамики гостевых молекул дополнены количественным теоретическим анализом энергий активаций.

По автореферату имеются следующие замечания:

1. Остается неясным результат взаимодействия каркаса MIL-52 (Al) с мета-ксилолом с точки зрения энергии процесса и селективности разделения.
2. Отсутствует сравнительный анализ влияния «не идеальности» структуры модельных объектов (качество кристаллической структуры, количество дефектов и неоднородностей) на подвижности гостевых молекул.
3. Упущено описание модернизации модели взаимодействия каркаса с магнитным полем, ранее представленное к.ф.-м.н. Колоколовым Д.И.

Эти замечания являются незначительными, не оспаривают выбранную автором методологию и не ставят под сомнения полученные фундаментальные результаты.

Считаю, что диссертационная работа « Исследование молекулярной подвижности углеводородов в микропористых металл-органических каркасах методом  $^2\text{H}$  ЯМР спектроскопии » удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к диссертации на

соискание степени кандидата физико-математических наук, изложенным в пункте 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24 сентября 2013 г, а его автор – Художитков Александр Эдуардович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.17 - химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Миличко Валентин Андреевич

к.ф.-м.н.

(специальность 01.04.21 – лазерная физика),

доцент, старший научный сотрудник физического факультета

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский университет ИТМО

197101, Санкт-Петербург, Кронверкский проспект, д. 49, литер А. <https://itmo.ru/ru/>

Тел. +7 (812) 457-18-46. E-mail: v.milichko@metalab.ifmo.ru

Согласен на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета и их дальнейшую обработку.

15.07.2021

Подпись Миличко В.А. заверяю

